

**POTENSI SENYAWA KANDUNGAN BAWANG PUTIH (*Allium Sativum L.*) SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER PAYUDARA :
STUDI KOMPUTASI**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi



RINDI SILALAH

31120079

PROGRAM STUDI S1 FARMASI

FAKULTAS FARMASI

UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA

TASIKMALYA

JUNI 2024

ABSTRAK

POTENSI SENYAWA KANDUNGAN BAWANG PUTIH (*Allium Sativum L.*) SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER PAYUDARA: STUDI KOMPUTASI

Rindi Silalahi

Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Bawang putih (*Allium sativum L.*) dan senyawa turunannya merupakan kandidat potensial untuk pengendalian kanker payudara, kemampuannya untuk mengurangi efek samping yang tidak diinginkan dari agen antikanker dan senyawa bawang putih juga dinilai memiliki efektifitas sebagai antikanker. dilakukan penelitian komputasi dengan metode *molecular docking* menggunakan *PyRx*, *molecular dynamic Desmond software for academic*, *Drug Scan* dengan *Lipinski's Rule of Five* serta analisis toksisitas dengan *website pKCSM* terhadap turunan senyawa bawang putih. Hasil *molecular docking* ke-106 senyawa, ergosterol memiliki energi bebas yang lebih rendah dari tamoxifen (1SQN = -10.00 kkal/mol dan 6PSJ = -10.42 kkal/mol) pada reseptor progesteron (1SQN) (-12.05 kkal/mol) dan estrogen (6PSJ) (-10.76 kkal/mol). Hasil simulasi *molecular dynamic* 100 ns menunjukkan bahwa senyawa Naringenin yang terikat pada reseptor progesteron (1SQN) dan Quercetin O-rhamnoside yang terikat pada reseptor estrogen (6PSJ) paling stabil. Berdasarkan hasil uji toksisitas, hanya senyawa ergosterol yang bersifat hepatotoksik dan hyperin yang bersifat toksik menurut parameter AMES.

Kata kunci: Anti-Breast Cancer, Estrogen, in silico, Progesteron

Abstract

Garlic (*Allium sativum L.*) and its derivatives have shown potential in controlling breast cancer, in terms of reducing the undesirable side effects of anticancer agents and increase their anticancer effectiveness. Computational research was conducted using various methods such as molecular docking using *PyRx* and molecular dynamic *Desmond*, *Drug Scan* using *Lipinski's Rule of Five*, and toxicity analysis using the *pKCSM website* on garlic compound derivatives. The results of molecular docking of 106 compounds showed that Ergosterol exhibited a lower free energy at the progesterone (1SQN) (-12.05 kcal/mol) and estrogen receptors (6PSJ) (-10.76 kcal/mol) than tamoxifen (1SQN = -10.00 kcal/mol and 6PSJ = -10.42 kcal/mol). Furthermore, the results of the 100 ns molecular dynamic simulation revealed that Naringenin, which binds to the progesterone receptor (1SQN), and Quercetin O-rhamnoside, which binds to the estrogen receptor (6PSJ), were the most stable. Based on the toxicity test results, only the Ergosterol compound was found to be hepatotoxic, while hyperin was found to be toxic according to AMES parameters.

Keywords: Breast Anticancer, Estrogen, in silico, Progesterone